



TITLE:

# 有機デバイスの基礎科学と高機能化

AUTHOR(S):

梶, 弘典

---

CITATION:

梶, 弘典. 有機デバイスの基礎科学と高機能化. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2018, 2017: 10-10

ISSUE DATE:

2018-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/230713>

RIGHT:

有機デバイスの基礎科学と高機能化  
Basic Science and Functionalization of Organic Devices

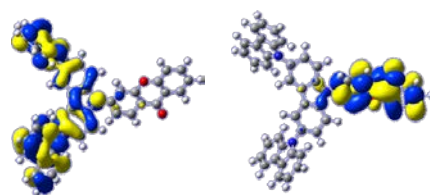
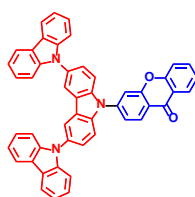
京都大学 化学研究所 分子材料化学研究領域

梶 弘典

研究成果概要

熱活性型遅延蛍光 (Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 材料は、有機 EL 素子中で生じる一重項および三重項励起状態を 100% の効率で光に変換できる発光材料として、近年、注目を集めている。TADF を効率的に発現させるためには、発光過程において重要となる一重項励起状態および三重項励起状態のエネルギー差 ( $\Delta E_{ST}$ ) を小さくし、なおかつ一重項励起状態と基底状態間の振動子強度を大きくすればよいことが知られている。そのためには発光材料の HOMO と LUMO を適度に空間分離させるような分子設計が要求される。本研究では京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、量子化学計算ソフトを用いた  $\Delta E_{ST}$  ならびに振動子強度の相対比較と HOMO、LUMO の可視化に基づく材料探索を実施した。量子化学計算には Linux 版 Gaussian 09 プログラムを、HOMO、LUMO の可視化には Windows 版 GaussView 5 を用いた。

材料探索の結果、電子ドナーである bicarbazol と電子アクセプターである xanthone を組み合わせた CCX-II において、 $\Delta E_{ST}$  の計算値が 50 meV と小さくなることから、CCX-II は TADF を示すことが示唆



HOMO

LUMO

された。さらに、最低励起一重項状態と基底状態間の振動子強度が

Figure 1. CCX-II の分子構造ならびに HOMO、LUMO の分布。

0.13 と大きいことから、CCX-II は高い発光効率を示すことが示唆された。CCX-II を発光材料として、有機 EL 素子 (素子構造 ITO (50 nm)/TAPC (70 nm)/CDBP (10 nm)/6 wt% CCX-II:PPF (20 nm)/PPF (10 nm)/BmPyPhB (30 nm)/Liq (1 nm)/Al (80 nm)) を真空蒸着法により作製した。上記の方法で作製した有機 EL 素子は高効率な青色発光を示し、最大で 25.9% の高い外部量子効率を示した[1]。

発表論文 (謝辞あり)

[1] Blue organic light-emitting diodes realizing external quantum efficiency over 25% using thermally activated delayed fluorescence emitters. Miwa, T., Kubo, S., Shizu, K., Komino, T., Adachi, C. & Kaji, H., *Sci. Rep.*, **7**, 284 (2017).